



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Irradiação Iônica em filmes semicondutores e a simulação com CompuCell3D
Autor	JULIO CÉSAR ROHR
Orientador	RAQUEL GIULIAN

Laboratório de Implantação Iônica - Instituto de Física - UFRGS
Irradiação Iônica em filmes semicondutores e a simulação com CompuCell3D

Autor: Júlio César Rohr
Orientador: Raquel Giulian

A irradiação com feixe de íons em específicos filmes semicondutores é conhecida por apresentar o efeito da porosidade, em que o material aumenta significativamente sua área de superfície, o que contribui, e muito, para que reações químicas que ali ocorrem aconteçam com muito mais eficiência. Atualmente, há algumas teorias que tentam explicar o surgimento da porosidade nesses casos, mas nenhum modelo eficaz de simulação que prevê o crescimento dos filmes.

Este projeto tem por objetivo dar continuidade ao modelo computacional já esboçado com o programa CompuCell3D a fim de obter simulações do crescimento da porosidade em filmes semicondutores irradiados com feixe de íons. Ao mesmo tempo que o programa CompuCell3D é eficaz na simulação de células, o projeto parte de um esboço de programa feito em Python para ser rodado no CompuCell3D com base no modelo de Potts. Apesar de uma sequência de imagens demonstrando o crescimento das vacâncias e do tamanho do filme serem obtidas já com o esboço, pouco é possível dizer sobre a proximidade com a realidade, visto que ainda não há uma relação direta entre as variáveis do programa e as propriedades do material. Além disso, propriedades como o tamanho inicial das vacâncias geradas requerem experimentos específicos com o material a ser simulado. Dessa forma, o principal objetivo do projeto é estabelecer a relação entre os parâmetros utilizados na simulação com os resultados obtidos experimentalmente, para posteriormente obter, através das simulações, informações sobre os materiais porosos, inacessíveis experimentalmente.